

ML 07: SUPPORT VECTOR MACHINE

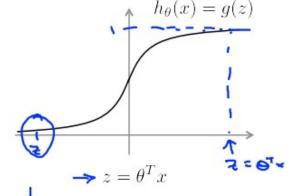
이번시간에 Support Vector Machine, SVM을 배운다.

Optimization Objective

먼저 직관을 얻기 위해 logistic regression 의 sigmoid function 을 좀 보자.

Alternative view of logistic regression

$$h_{\theta}(x) = \frac{1}{1 + e^{-\theta^T x}}$$



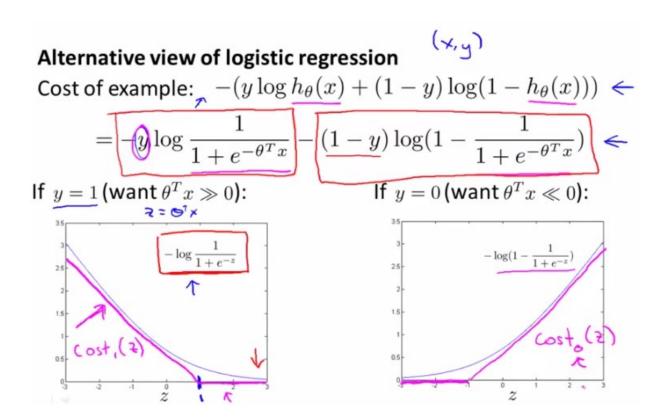
If
$$\underline{y}=1$$
, we want $\underline{h_{\theta}(x)} \approx \underline{1}$, $\underline{\theta}^T x \gg \underline{0}$ If $\underline{y}=0$, we want $\underline{h_{\theta}(x)} \approx \underline{0}$, $\underline{\theta}^T x \ll \underline{0}$

$$\frac{\theta^T x \gg 0}{\theta^T x \ll 0}$$

(http://blog.csdn.net/abcjennifer)

y = 1 이면 0^Tx >> 0 이어야 h(x) 가 1 에 가까워 진다.

이제 $cost\ function$ 에 h(x) 를 넣자. 그리고 m=1 인 트레이닝 셋에 대해서 보면



파란 그래프에서 볼 수 있듯이 y = 1 일때 0^{n} Tx >> 0 이면 cost 가 상당히 낮아지는걸 볼 수 있다. 이 그래프를 좀 단순화 해서 x7x7 그래프를 만들어 보자. 두개의 직선으로 만들었는데, 이 cost function 을 계산하면 상당히 근접한 값을 얻을 수 있고, 동시에 그래프가 단순해져 computational advantage 를 얻을 수 있다.

각각 좌측, 우측에 있는 cost function 을 이렇게 쓴다.

$$cost_1(z)$$
 $(y = 1)$
 $cost_0(z)$ $(y = 0)$

logistic regression 식 에서 $-\log h(x)$ 를 $cost_1(z)$ 로, $-\log(1 - h(x)))$ 를 $cost_0(z)$ 로 바꾸면

$$min_{\theta} \frac{1}{m} \left[\sum_{i=1}^{m} y^{(i)} (-log \ h_{\theta}(x^{(i)})) + (1 - y^{(i)}) \ (-log(1 - h_{\theta}(x^{(i)}))) \right] + \frac{\lambda}{2m} \sum_{j=1}^{n} \theta_{j}^{2}$$

$$cost_1(z) (y = 1)$$

 $cost_0(z) (y = 0)$

$$cost_{1}(z) (y = 1) cost_{0}(z) (y = 0) min_{\theta} \frac{1}{m} [\sum_{i=1}^{m} y^{(i)} cost_{1}(\theta^{T}x) + (1 - y^{(i)}) (cost_{0}(\theta^{T}x))] + \frac{\lambda}{2m} \sum_{j=1}^{n} \theta_{j}^{2}$$

이 때, 1/m 은 상수이므로 제거해도 어차피 똑같은 0(theta) 를 얻을 수 있다. 그리고 식을 좀 간략히 적어보면

$$min_{\theta} A + \lambda B$$

여기서 lambda 가 하는 일은 *low cost ('A')* 와 *small parameter ('B')* 를 조절하는 일이다. 식을 좀 변경하면 이렇게도 볼 수 있다. 여기서 C 는 1 / lambda 과 같은 역할이라 보면 된다.

$$min_{\theta} C + \lambda B$$

아주 작은 수의 [lambda] 를 사용하면 파라미터 B 가 커지는데, 이것은 C 가 커져 A 를 낮추고 B 를 높이는 것과 똑같다. 반대로 C 가 작으면 A 가 커지고, B 가 작아진다.

결국 C 를 쓰느냐 1ambda 를 쓰느냐는, 어떤 항을 옵티마이제이션의 중심으로 두 느냐다. 최적화된 파라미터를 찾는건 똑같다.

식을 마지막으로 정리하면,

$$min_{\theta} \ C \ [\sum_{i=1}^{m} y^{(i)} cost_{1}(\theta^{T}x) \ + \ (1-y^{(i)}) \ (cost_{0}(\theta^{T}x))] \ + \ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \theta_{j}^{2}$$

결국 위 식 (*cost*) 를 최소화 하면, y = 1 일때 0^Tx >> 0 이 되므로 h(x) == 1 이란 뜻이다.

SVM hypothesis

$$\implies \min_{\theta} C \sum_{i=1}^{m} \left[y^{(i)} cost_1(\theta^T x^{(i)}) + (1 - y^{(i)}) cost_0(\theta^T x^{(i)}) \right] + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \theta_j^2$$

Hypothesis:

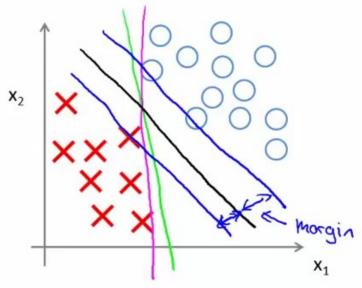
(http://blog.csdn.net/abcjennifer)

Large Mingin Intuition

SVM 은 large margin classifier 라 부르도 한다. 왜 그런게 한번 살펴보자.

두 집단을 구분하는 초록색, 자주색, 검은색 직선을 생각해 보자.

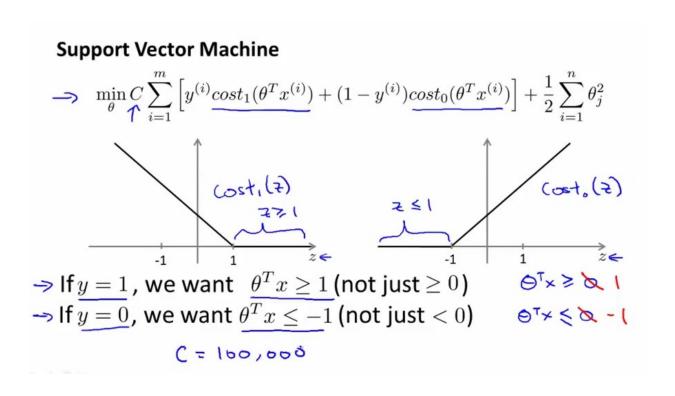




Large margin classifier

검은색 선이 가장 낫고, 자주색과 초록색은 두 집단을 분리하긴 하는데 썩 만족할만하게는 아니다. 검은 선과 평행하고 각 점까지의 거리가 최소인 파란선을 그리자. 이걸 margin 이라 부른다. 다시 말해서 margin 이 클수록 좋은 classification 이다.

large margin 하고 SVM 하고 무슨 상관일까? 그 전에 먼저 € 를 좀 살펴보자.



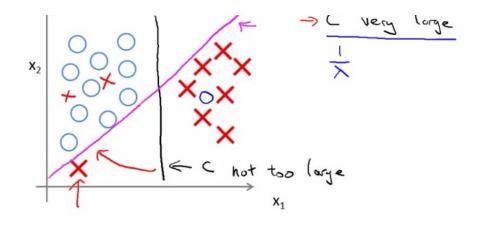
(http://blog.csdn.net/abcjennifer)

 $z == 0^{T} x$, 의 범위를 생각해 보면 y = 1 일때 z >= 1 이길 바란다. 반대로 y = 0 이면 z <= -1 이면 h(x) 로 충분히 만족할 만한 값을 얻을 수 있다.

이 때 C 가 매우 크면 A 즉, 아래의 식은 굉장히 작아진다. 거의 0 에 가깝게

$$\sum_{i=1}^{m} y^{(i)} cost_{1}(\theta^{T} x) + (1 - y^{(i)}) (cost_{0}(\theta^{T} x))$$

Large margin classifier in presence of outliers

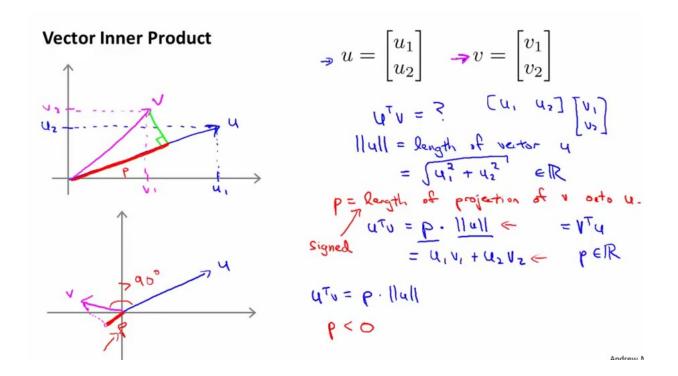


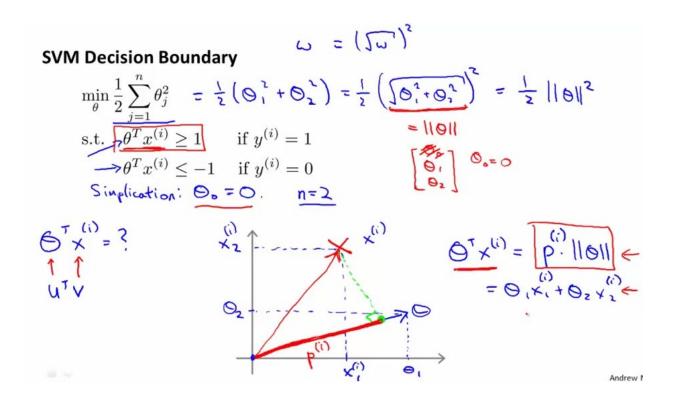
(http://blog.csdn.net/abcjennifer)

두 집단에 대해서 C 가 매우 크면, 다시 말해 A 가 0 에 가까우면 overfitting 된다 볼수 있으므로 자주색과 비슷한 라인을 찾아낸다. 자주색 선은 모든 샘플에 대해 large margin 을 가지고 있지만 그렇게 썩 좋은 classification 이라 볼 수는 없다.

그러나 C 가 그렇게 크지 않으면 비 정상적인 샘플들은 조금 무시하고 검은색 선을 찾아낸다. 이게 SVM 이 작동하는 방식이다.

Mathematics Behind Large Margin Classification





(http://blog.csdn.net/abcjennifer)

결국 C 가 아주 클 때 A = 0 이므로 SVM cost fucntion 을 최소화 하는 것은 아래 식과 동일하다. 그런데 이 식을 풀어 보면

$$min_{\theta} \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{n} \theta_{j}^{2}$$
$$= \frac{1}{2} \|\theta\|^{2}$$

그리고 0(theta) 와 x 를 벡터이므로 0^{T} $x^{(i)} = p^{(i)} * ||0||$ 라 볼 수 있다. (여기서 $p^{(i)}$ 는 x 의 0 로의 projection 된 선의 길이)

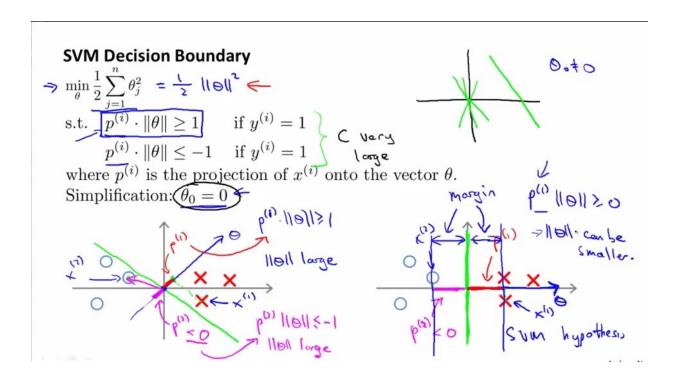
$$\theta^T x$$

$$= p^{(i)} \|\theta\|$$

이제 이 식을 좀 활용해 보자. C 가 매우 클때는 B 만 최소화 하면 되는데

$$min_{\theta} \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{n} \theta_{j}^{2}$$

이 식 자체가 large margin 을 찾아낸다. 왜 그런가 보면



(http://blog.csdn.net/abcjennifer)

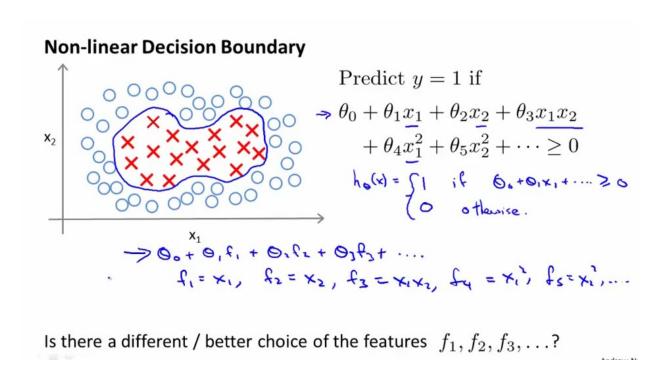
왼쪽 그래프의 계산 과정을 보면 x1 을 0 에 projection 해서 얻은 p1 이 매우 작다. 따라서 p1 * ||0|| >= 1 에서 ||0|| 가 커야 전체 식이 1보다 커지는데, 이러면 식 B 를 최소화 할 수 없다. 마찬가지로 p2 는 매우 작은 음수고, p2 * ||0|| <= -1 에서, ||0|| 가 매우 큰 음수여야 한다. 이 또한 0 를 크게 만드므로 식 B 가 작아지는 0 를 찾지 못한다.

결국 p 가 커야만 0 가 작아지기 때문에 p 를 크게 하는 0 만 찾고, 이것은 *large* margin 이다. 따라서 초록색 같은 *low margin* 의 0 는 선택되지 않는다.

정리하자면 $\boxed{\mathbf{C}}$ 가 매우 클때 SVM은 $large\ magin$ 을 찾고, 여기서 $\boxed{\mathbf{C}}$ 를 낮춤으로써 적당한 수준의 classification을 얻을 수 있다.

$$min_{\theta} \ \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{n} \theta_{j}^{2}$$

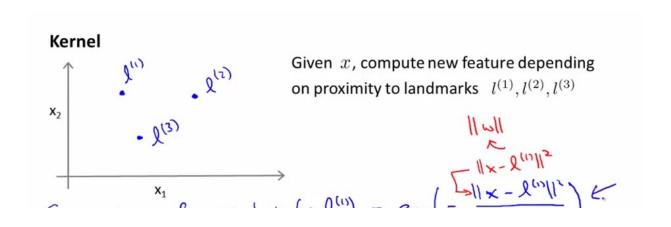
Kernels



(http://blog.csdn.net/abcjennifer)

SVM 으로 non-linear decision boundary 를 어떻게 찾아낼까? 단순히 high polynomial features 를 사용하는 것보다 더 나은 방법은 없을까? 고차 다항식은 이미지 처리 예제에서도 봤지만, 계산 비용이 너무 비싸다.

kernel 이란 개념이 있다.



Griven x:
$$f_1 = Similarity(x, x) = exp(= 262)$$

$$f_2 = Similarity(x, x) = exp(= 262)$$

$$f_3 = Similarity(x, x) = exp(....)$$

$$f_3 = Similarity(x, x) = exp(....)$$

$$f_4 = Similarity(x, x) = exp(....)$$

$$f_5 = Similarity(x, x) = exp(....)$$

$$f_6 = Similarity(x, x) = exp(....)$$

$$f_7 = Similarity(x, x) = exp(....)$$

$$f_8 = Similarity(x, x) = exp(.....)$$

$$f_8 = Similarity(x, x) = exp(....)$$

수동으로 몇몇 landmark 11, 12, ... 을 고른후 이 landmark 사이와의 거리로 새로운 feature f 를 만든다.

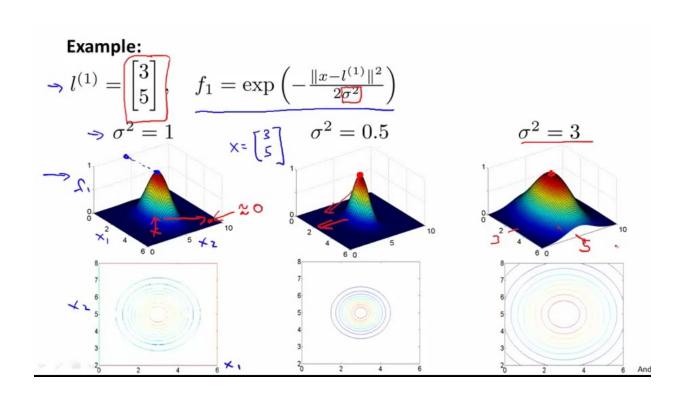
$$f_1 = similarity(x, l^{(1)}) = exp(-\frac{||x - l^{(1)}||^2}{2\sigma^2})$$

dl *similarity function* 을 *kernel function* 특히 여기서 사용한 수식은 *gaussian kernel* 이라 부른다.

Kernels and Similarity
$$f_1 = \text{similarity}(x, \underline{l^{(1)}}) = \exp\left(-\frac{\sum_{j=1}^{n} (x_j - l_j^{(1)})^2}{2\sigma^2}\right) = \exp\left(-\frac{\sum_{j=1}^{n} (x_j - l_j^{(1)})^2}{2\sigma^2}\right)$$
If $\underline{x} \approx \underline{l^{(1)}}$:
$$f_1 \approx \exp\left(-\frac{\sigma^2}{2\sigma^2}\right) \approx 1$$

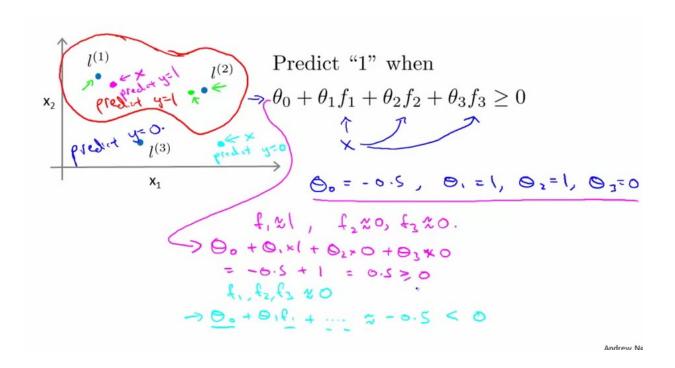
$$f_2 \approx \frac{1}{2\sigma^2}$$
If \underline{x} if far from $\underline{l^{(1)}}$:
$$f_1 = \exp\left(-\frac{(\log n_{\text{unker}})^2}{2\sigma^2}\right) \approx 0$$
.

x 와 1 이 상당히 가까우면 f 는 1 에 근접하고, 상당히 멀면 0 에 가까워진다.



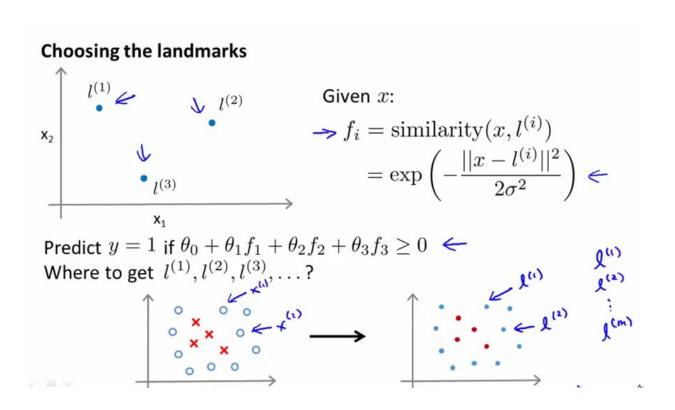
(http://blog.csdn.net/abcjennifer)

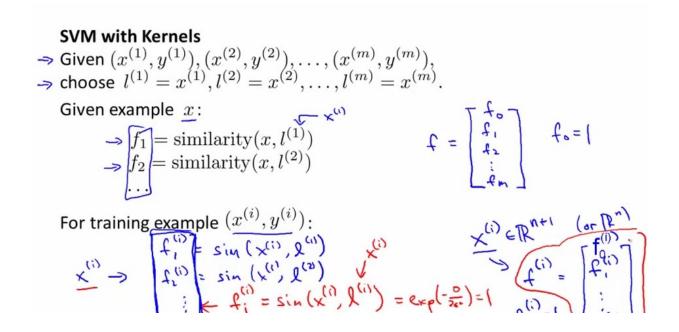
위 그림은 시그마에 따른 f 값의 변화를 보여주는데, 시그마가 작으면 작을수록 조금만 멀어도 f 값은 0 에 가까워진다.



데이터가 landmark 중 하나에 라도 가까우면 적어도 하나의 f 가 1이 되어, h(x) 가 1이되고 반면 모든 landmark 에 멀면 모든 f 가 0 이 되어 h(x) 가 0 이된다.

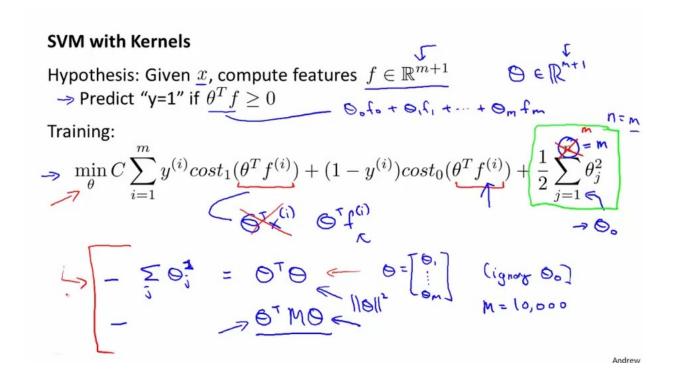
그럼 이제, 문제는 어떻게 landmark 를 정할 것인가?







11, ..., lm 을 x1, ..., xm 라 하자. 즉 각 training example 이 landmark 가 된다. 이를 이용해 구한 feature vector f^(i) 중 하나는 sim(x^i, 1^i) 이므로 1이 된다.



(http://blog.csdn.net/abcjennifer)

따라서 주어진 x 에 대해 m+1 의 벡터 f 를 구해 0^{n} 0^{n} 이면 y=1 이다. 그리고 이 때 f f f 이 되므로

$$min_{\theta} \ C \ \sum_{y=1}^{m} cost_{1}(\theta^{T} f^{(i)}) + (1 - y^{(i)}) cost_{0}(\theta^{T} f^{(i)})) + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{m} \theta_{j}^{2}$$

마지막 항을 좀 자세히 보면

$$\sum_{j=1}^{T} \theta_j^2$$

$$= \theta^T \theta$$

인데 SVM 실제 구현에서는 가운데 M 매트릭스를 삽입해 좀더 효율적으로 돌아가도록 한다. 이 M 은 어떤 kernel 을 사용하는지에 따라 다르다.

$$\theta^T M \theta$$

logistic regression 에 kernel을 사용할 수도 있겠지만, 상당히 느리다. 반면 SVM 에서 는 마지막 항을 위 처럼 수정할 수 있기에 빠르게 동작한다.

Bias vs Variance in SVM

SVM parameters:

C ($=\frac{1}{\lambda}$). > Large C: Lower bias, high variance. > Small C: Higher bias, low variance.

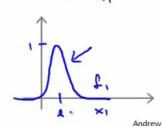
(small)

(large X)

Large σ^2 : Features f_i vary more smoothly. σ^2

 \rightarrow Higher bias, lower variance. $exp(-\frac{\|x-y^{(i)}\|^2}{2c^{1/2}})$

Small σ^2 : Features f_i vary less smoothly. Lower bias, higher variance.



- (1) c 가 크면 low bias, high variance (== small Lambda
- (2) C 가 작으면 high bias, low variance (== large Lambda

sigma 가 크면 f 가 적게 변하기 때문에 인풋 x 에 대해서도 *high bias, low variance* 다.

Using an SVM

Other choices of kernel

Note: Not all similarity functions similarity(x, l) make valid kernels.

(Need to satisfy technical condition called "Mercer's Theorem" to make sure SVM packages' optimizations run correctly, and do not diverge).

Many off-the-shelf kernels available:

- Polynomial kernel: $k(x, l) = (x^T l + (x^T l + 5))^{-1}$ $(x^T l + 5)^{-1}$

- More esoteric: String kernel, chi-square kernel, histogram intersection kernel, ...

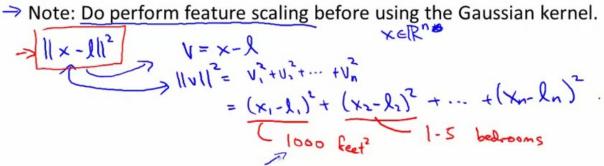
(http://blog.csdn.net/abcjennifer)

라이브러리를 사용하더라도 C 와 어떤 kernel 을 사용할지는 골라야 한다.

feature 가 크고, 트레이닝셋이 작을때는 overfitting 될 수 있으므로 linear kernel 을 사 용하는 편이 낫다.

반면 n 이 작고, m 이 클 경우에는 non-linear 가설일 수 있으므로 gaussian kernel 을 사용할 수 있다. 그러면 sigma 를 골라야 한다.

Kernel (similarity) functions:
$$f = \exp\left(\frac{\mathbf{x}_1 \cdot \mathbf{x}_2}{2\sigma^2}\right)$$



SVM 라이브러리를 이용할때는 kernel function 을 직접 구현해야 한다. 이걸 이 용해서 라이브러리는 x 에 대해 f_1, \ldots, f_1 을 계산한다.

만약에 feature 의 스케일이 다르면, x1 = 10000, x2 = 5, ... ||x-1||^2 값 이 숫자가 큰 항에 의해 좌우될 수 있으므로 feature scailing을 하는편이 좋다.

Other choices of kernel

Other choices of kernel

Note: Not all similarity functions similarity(x, l) make valid kernels.

→ (Need to satisfy technical condition called "Mercer's Theorem" to make sure SVM packages' optimizations run correctly, and do not diverge).

Many off-the-shelf kernels available:

Polynomial kernels $k(x, l) = (x^T l + (x^T l + 5))$ $(x^T l)^3, (x^T l + 1)^3, (x^T l + 5)$

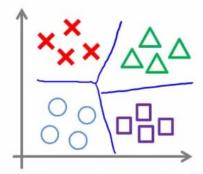
- More esoteric: String kernel, chi-square kernel, histogram intersection kernel, ... sim(x, 2)

SVM 구현들이 계산을 최적화 하기위해 다양한 트릭을 이용한다. 이로 인해 모든 similarity function 유효한 커널이 되는건 아니고, "Mercer's Theorem"을 만족해야만 한다. 인용하려-했는데-무슨말인지-모르겠음

그렇다고 커널이 *linear* 와 *gaussian* 만 있는건 아니고 다양한 커널이 있다. 그림을 참조하자.

Multi-class classification

Multi-class classification



$$y \in \{1, 2, 3, \dots, K\}$$

Many SVM packages already have built-in multi-class classification functionality.

Otherwise, use one-vs.-all method. (Train K SVMs, one to distinguish y=i from the rest, for $i=1,2,\ldots,K$), get $\theta^{(1)},\theta^{(2)},\ldots,\underline{\theta^{(K)}}$ Pick class i with largest $(\theta^{(i)})^Tx$

(http://blog.csdn.net/abcjennifer)

대부분의 SVM 라이브러리들은 multi-class 에 대한 함수를 제공한다. 그러나 이것들을 사용하는 대신 one-vs-all 방법을 사용할 수도 있다. k 개의 클래스가 있다면 k 개의 SVM 훈련시키면 된다.

Logistic regression vs SVM

Logistic regression vs. SVMs

n = number of features ($x \in \mathbb{R}^{n+1}$), m = number of training examples n = 10 is large (relative to n): $(e_n, n \ge n)$

-> Use logistic regression, or SVM without a kernel ("linear kernel")

slower to train.

If n is small, m is intermediate: (n=1-1000, m=10-10,000)
 ⇒ Use SVM with Gaussian kernel
 If n is small, m is large: (n=1-1000, m=50,000+)
 ⇒ Create/add more features, then use logistic regression or SVM without a kernel
 ⇒ Neural network likely to work well for most of these settings, but may be

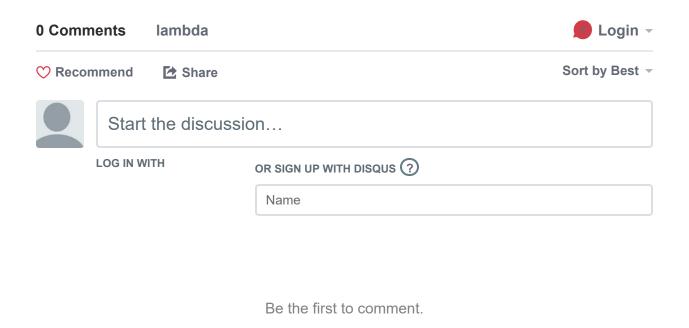
(http://blog.csdn.net/abcjennifer)

- (1) n >= m 이면 logistic regression 이나 linear kernel 이 낫다.
- (2) n 이 작고, m 이 중간 사이즈면 gaussian kernel 을
- (3) n 이 작고 m 이 크면 gaussian 은 상당히 느려진다. feature 를 좀 수정하고, logistic 이나 linear kernel 을 이용한다.

SVM의 장점은 다양한 kernel을 non-linear function을 훈련시키기 위해 사용할 수 있다는 점이다.

References

- (1) Machine Learning by Andrew NG
- (2) http://blog.csdn.net/linuxcumt
- (3) http://blog.csdn.net/abcjennifer



ALSO ON LAMBDA

10분만에 Github Profile 만들기

6 comments • 2 years ago

sMiLo — Windows 환경에서 nvmwindows 설치 후 진행하니 아래 에러가 발생 했습니다.\$ omg init githubsmilo oh-

하스켈로 배우는 함수형 언어 4

1 comment • a year ago

Junmo Roger Kang — 아이고 공부가 드 디어 모나드에서 걸리네요 ㅜㅜ

CLOS, Common Lisp Object System

1 comment • 4 years ago

Philipe Dallaire — i'm drunk and was searching for something else about lisp but this answered questions I never

HOME

1 comment • a year ago

Eunju Amy Sohn — 공부에 많은 도움을 받고 있습니다. 양질의 포스팅을 많이 올려주셔서 감사합니다!





